

2026年5月15日

引きつけなくても分子は取り込める ～ ホスト構造の自己最適化によるゲスト取り込み機構を説明 ～

<概要>

帝京大学医療共通教育研究センター教授 星野学と同センター長 大胡恵樹は、12個のベンゼン環が環状に結合した分子 [12] シクロパラフェニレン ([12] CPP) が、構造をわずかに変形させることで、通常はほとんど相互作用^{※1} しない分子を内部空間に取り込み、結晶化させる (図 1) ことを発見しました。本成果により、液体を冷却して結晶化させる従来の方法とは異なり、[12] CPP と混合するだけで液体分子を含んだ結晶を得ることが可能となります。この手法は、通常では困難である液体分子の構造解析や、新しい材料開発への応用が期待されます。

本研究成果は2026年5月14日(木)(現地時間)に「Journal of the American Chemical Society」に掲載されました。

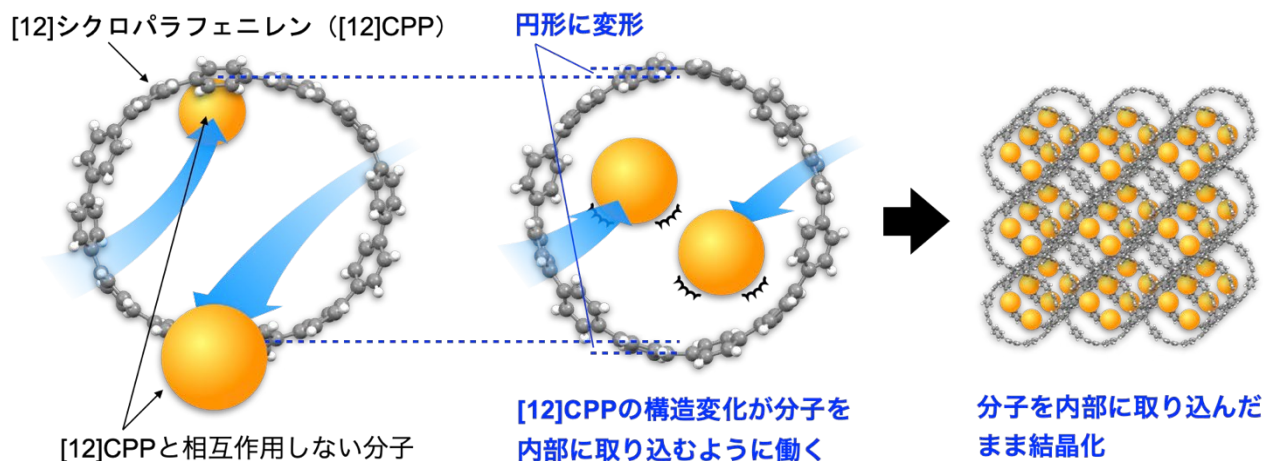


図1 [12] シクロパラフェニレン ([12] CPP) が構造を変形させて相互作用しない分子を取り込み結晶化する模式図。

<研究の背景>

金属有機構造体 (MOF) などに代表されるように、周囲の分子を内部空間に取り込む物質は「ホスト」、取り込まれる分子は「ゲスト」と呼ばれます。一般にホストがゲストを取り込むためには、両者の間に分子間相互作用が必要であると考えられています。そのため、相互作用が弱い場合には、ゲストをホストの内部に保持することは困難とされてきました。

<研究の内容>

星野教授らの研究グループは、[12] CPP がよく溶ける ([12] CPP と分子間相互作用が強い) 液体と、ほとんど溶けない (相互作用が弱い) 液体を組み合わせる実験を行いました。その結果、[12] CPP は相互作用が弱い液体分子をゲストとして内部空間に取り込み、そのまま結晶化することを見出しました。

さらに構造解析の結果、相互作用が弱い分子を取り込んだ場合、[12] CPP はより円形に近い形状をとることが分かりました。一方、相互作用が強い分子を取り込む場合には、より歪んだ楕円構造となっていました。

このことから、[12] CPP が歪みの少ない安定な円形に近づくように構造を変化させる「構造の自己最適化」が、相互作用が弱い分子を内部に一時的に保持する働きをし、その状態が結晶化の起点となることが明らかになりました。

<研究の成果の意義>

分子には、互いに鏡像関係にある「右手型」「左手型」と呼ばれる構造（キラリティー※²）が存在し、医薬品などの性質にも大きな影響を与えます。その判定には単結晶 X 線構造解析※³が広く用いられますが、対象分子が液体の場合には結晶化が困難であるという課題がありました。

本研究では、この課題に対し、[12] CPP を利用することで液体分子を結晶化させ、その構造解析を可能にしました。実際に香料などの液体分子のキラリティーの決定にも成功しています（図 2）。

このように本成果は、ホストによるゲスト取り込みの新しい仕組みの解明にとどまらず、液体分子の構造解析や機能材料開発への応用が期待されます。また、本研究で明らかにした分子取り込みのメカニズムは、従来の相互作用に基づくものとは異なり、ホストが構造を最適化することで相互作用の弱い分子も取り込めることを示した点で、新たな知見をもたらします。

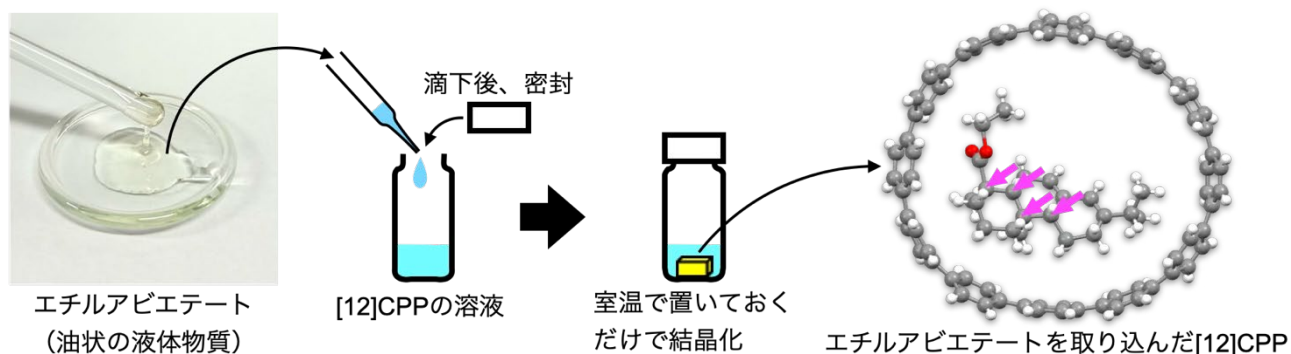


図 2 [12]CPP を利用して液体（エチルアビエート）のキラリティーを決定した概略図。分子構造図中に矢印で示した箇所の三次元的な原子配置がキラリティーに関係している。

<特記事項>

本研究は、住友財団基礎科学研究助成 (No. 210266)、科学技術振興機構 (JST) 戦略的創造研究推進事業 さきがけ (JPMJPR1776)、帝京大学研究奨励助成金 (No. 2200005)、帝京大学先端総研チーム研究助成金 (No. 23-38) の助成により行われました。

本研究成果は 2026 年 5 月 14 日 (木) (現地時間) に「Journal of the American Chemical Society」に掲載されました。

- ・ タイトル : Host-Guest Complexation through Geometric Self-Optimization in [12]Cycloparaphenylene
- ・ 著者 : Manabu Hoshino, Yoshiki Ohgo
- ・ DOI : 10. 1021/jacs. 6c02199
- ・ URL : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.6c02199>

<用語説明>

※1 相互作用

複数の原子や分子が互いに引きつけ合う力のこと。原子が持つ電荷や、分子内での電荷の偏りが関係し、それらが静電的に引き合うことで働く。分子間力ともよばれる。

※2 キラリティー

右手と左手のように、物体や分子の三次元的な構造が互いに鏡に映した関係にあり、どのように並進・回転させても重ね合わせることができない性質のこと。同じ原子で構成された分子であってもキラリティーが異なると別の性質を示すことから、医薬品や香料などでは、生産した物質が「右手型」か「左手型」かを決定することは重要な評価事項である。

※3 単結晶 X 線構造解析

原子や分子が規則正しく配列した固体である単結晶を作成し、X 線を照射して測定したデータを解析することで、単結晶中の三次元的な原子配置や分子構造を決定する分析技術。

【本件に関する問い合わせ先】

<研究に関すること>

帝京大学 医療共通教育研究センター 教授

星野 学

TEL : 03-3964-1211 (内線: 40362)

E-mail : hoshino.manabu.ly@teikyo-u.ac.jp

<報道に関すること>

帝京大学本部広報課

TEL : 03-3964-4162

E-mail : kouhou@teikyo-u.ac.jp